

# Investigations numériques de l'auto inflammation des mélanges méthane/air en mode HCCI

B. BOUMEDDANE.

Laboratoire moteurs à combustion interne, Département de mécanique, Faculté des sciences de l'ingénieur,  
Université Saad DAHLEB , BLIDA , Route de Soumaa, BP 270, 09000, BLIDA, ALGERIE

## Résumé :

*Avec l'augmentation du souci concernant la baisse de la production d'énergie et la protection de l'environnement, la recherche sur les combustibles de substitution propres a attiré ces dernières années l'attention des scientifiques et des ingénieurs. De plus, la réglementation de plus en plus rigoureuse concernant les émissions de CO<sub>2</sub> d'une part et l'épuisement des réserves de combustible fossile d'autre part , a poussé la communauté scientifique à trouver des alternatives à ces combustibles. En effet, l'accroissement du parc automobile a engendré une augmentation de la consommation des combustibles conventionnels responsables de la hausse continue des émissions de polluants (monoxyde de carbone, hydrocarbures imbrûlés, oxydes d'azote et particules) et des gaz à effet de serre. La recherche dans les domaines de la qualité des carburants et de la combustion permettra une réduction progressive des émissions de polluants, une protection accrue de l'environnement et une amélioration du cadre de vie. L'addition de l'hydrogène au méthane a un effet sur la réduction du délai d'inflammation du mélange et l'augmentation de l'avance à l'allumage et la réduction de la pollution. L'addition d'hydrogène peut être considéré donc comme un élément de contrôle de l'auto allumage des mélanges de combustibles méthane/hydrogène. Les résultats obtenus sur l'auto inflammation des mélanges méthane/hydrogène en mode HCCI sont très satisfaisants et ouvre la voie à une meilleure compréhension de la combustion de ces types de mélange.*

## Abstract :

*With increasing concern on environmental protection and the impact of the depletion of the world's oil reserves and its consequences for energy production and automotive propulsion, research on clean fuels of substitution drew these last years the attention of the scientists engineers. Moreover, the increasingly rigorous regulation concerning the CO<sub>2</sub> emissions on one hand and the depletion of fossil fuel reserves on the other hand, pushes the scientific community to find alternatives to these fuels. Indeed, the growth of the number of vehicles has led to an increase in the consumption of conventional fuels responsible of the continuous rise of emissions of pollutants (carbon monoxide, unburnt hydrocarbons, nitrogen oxides and particles) and gases with greenhouse effect. Research in the fields of fuel quality and combustion will allow a gradual reduction of emissions of pollutants, an increased protection of the environment and improved quality of life. Hydrogen addition to methane has an effect on reducing the ignition delay of the mixture and increased spark advance and the reduction of pollution. The addition of hydrogen can therefore be considered as an element of control of auto -ignition of methane / hydrogen fuel mixtures. The obtained results on methane/hydrogen mixtures auto ignition on HCCI mode are very satisfactory and opens the way to a better understanding of combustion of such mixtures.*

**Mots clefs:** méthane, hydrogène, auto inflammation, moteur HCCI, combustion, simulation numérique, cinétique chimique.

## 1 Introduction

Le gaz naturel est considéré comme l'un des carburants de substitution propre et très prometteur vu sa large

utilisation dans les moteurs hybrides à allumage commandé et du fait des qualités spécifiques de ce carburant. Le méthane, qui est l'élément principal de la composition du gaz naturel, avec un faible rapport carbone sur hydrogène, libère des quantités très faibles de CO<sub>2</sub> par rapport aux carburants d'origine pétrolière. Les émissions de polluants dans les moteurs alimentés au gaz naturel sont donc plus faibles que celles des moteurs conventionnels à l'essence ou au gasoil. De plus, le gaz naturel présente un indice d'octane assez élevé (de l'ordre de 130), ce qui permet d'une part une résistance accrue à la détonation et une augmentation du rendement du moteur d'autre part. Toutefois, le méthane possède certains inconvénients à savoir sa vitesse de flamme faible et sa sensibilité accrue aux variations cycliques au cours du fonctionnement, ne permet pas d'utiliser ce carburant pour une motorisation sans qu'il ne soit associé à un autre combustible ayant une vitesse de flamme plus grande et une sensibilité à la variation cyclique plus faible. L'hydrogène est un excellent additif pour améliorer la combustion du gaz naturel en raison de sa faible énergie d'allumage et de sa grande vitesse de flamme. L'addition d'une petite quantité d'hydrogène dans le gaz naturel pourrait améliorer la combustion du mélange et de réduire les émissions de gaz polluants à l'échappement. De plus, l'amélioration de l'efficacité thermique du moteur et la réduction des émissions de CO et de HC peuvent être obtenus en ajoutant une petite quantité d'hydrogène dans le gaz naturel lors du fonctionnement en mélange pauvre. Dans cette étude, on montre l'effet de l'addition de l'hydrogène au méthane sur le moment et la durée de l'auto inflammation du mélange. Le tableau suivant montre certaines propriétés comparées de l'hydrogène et du méthane.

Propriété	H <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>
Masse molaire	2,0158	16,043
PCI, pouvoir calorifique inférieur	119930 Kj/kg	50020 Kj/kg
Température d'auto inflammation dans l'air	858 K	813 K
Température de flamme dans l'air à 300K	2318 K	2148 K
Vitesse de flamme dans l'air	260 cm/s	37 cm/s

## 2 Formulation mathématique

La détermination du moment et de la durée de l'auto inflammation du mélange réactif requière la connaissance de l'évolution de la température à l'intérieur du cylindre en fonction du degré de rotation du vilebrequin. La résolution numérique des équations de conservation décrivant l'évolution du mélange réactif durant le cycle de fonctionnement du moteur permet la détermination de l'évolution temporelle des paramètres de thermodynamiques à l'intérieur du cylindre. Les équations de conservation décrivant un réacteur homogène à volume variable et possédant des conditions aux limites variables dans le temps sont données par le système suivant d'équations différentielles ordinaires EDO de 1<sup>er</sup> ordre, non linéaires et de type raide :

$$\begin{cases} \frac{dm}{dt} = \sum_j \dot{m}_j \\ \frac{d(mU)}{dt} = \left\{ -P \frac{dV}{dt} + \frac{dQ_{ht}}{dt} + \frac{dQ_{hr}}{dt} + \sum_j h_j \dot{m}_j \right\} \\ \frac{dm_k}{dt} = VW_s \omega_k \quad k = 1, \dots, N_{sp} \end{cases} \quad (1)$$

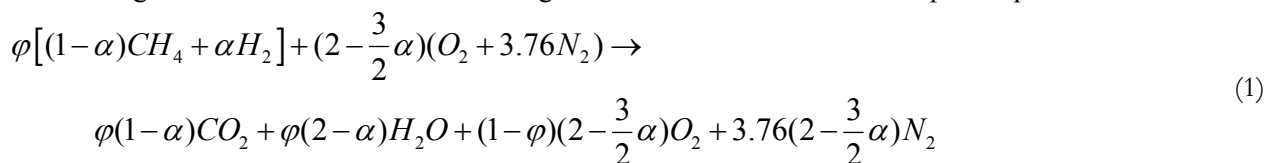
Les différents phénomènes se produisant dans un moteur, tels que le transfert de masse et de chaleur à travers les soupapes, le transfert de chaleur aux parois et la cinétique chimique d'oxydation du combustible avec l'air sont pris en compte dans la modélisation par différents sous modèles décrivant ces phénomènes. Les équations différentielles gouvernant la cinétique chimique de production ou destruction des espèces chimiques sont des équations du type raide et leurs intégrations nécessitent des algorithmes appropriés et des pas de temps très réduits pour suivre l'évolution très raide de la température au cours de la combustion. L'intégrateur de D.Mott & al [3] de type prédicteur correcteur est utilisé dans cette étude à cause de sa

grande stabilité numérique dès lors que la condition sur le pas de temps est respectée. Par contre les deux premières équations du système représentant la conservation de la masse et de l'énergie sont du type non raide et leur intégration numérique dans le temps est effectuée en utilisant l'algorithme prédicteur correcteur d'Adams Bashforth de quatrième ordre.

La simulation d'un point de fonctionnement est réalisée sur plusieurs cycles de calcul pour vérifier la périodicité de tous les paramètres thermodynamiques et déterminer des conditions en début de compression exactes permettant une prédiction correcte du moment et la durée de l'auto inflammation du mélange réactif. La simulation numérique est basée sur un model zéro dimensionnel à une seule zone et tient compte de la variation de la masse, de l'énergie et des espèces durant le cycle de fonctionnement du moteur

### 3 Auto inflammation des mélanges méthane/hydrogène

La réaction globale de combustion d'un mélange CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> dans l'air est donnée par l'équation suivante :



Où  $\alpha$  représente la fraction molaire d'hydrogène dans le mélange CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub>

$$\alpha = \frac{n_{H_2}}{n_{CH_4} + n_{H_2}} \quad (2)$$

Et  $\varphi$  représente la richesse du mélange

Pour simuler la cinétique chimique d'oxydation des mélanges CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> dans l'air trois mécanismes réactionnels ont été utilisés.

Cinétique	Nbre de réactions	Nbre d'espèces
GRI-MECH1.2 (19)	177	38
RAMEC (15)	190	38
UBC 2.1 (11)	194	39

### 4 Résultats et discussions

Pour montrer l'effet de l'addition de l'hydrogène sur l'auto inflammation des mélanges CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> dans l'air, plusieurs tests du code de calcul ont été réalisés sur un moteur type ayant les caractéristiques suivantes. La variation du paramètre  $\alpha$  a été prise entre 0% (méthane pur) et 100 % (Hydrogène pur) et la riche du mélange égale à 0.4 (mélange pauvre). Les concentrations des espèces CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> et N<sub>2</sub> sont tirées de l'équation d'oxydation globale 2 pour un réacteur à volume variable échangeant de la chaleur et de la masse à travers ses frontières. Le modèle utilisé est zéro dimensionnel et contient une seule zone homogène. Le code de calcul traite les différentes phases du cycle (compression, détente, échappement et admission).

AOA	20°	$\varepsilon$	16
RFA	0°	T <sub>parois</sub>	400 K
AOE	20°	T <sub>in</sub>	400 K
RFE	20°	P <sub>in</sub>	1 Bar
$\varphi$	0.4	$\alpha$	0 à 100%

La cinétique chimique est prise en compte dans le programme depuis le moment où la soupape d'admission est fermé et jusqu'au moment où la variation des concentrations des espèces devient négligeable.

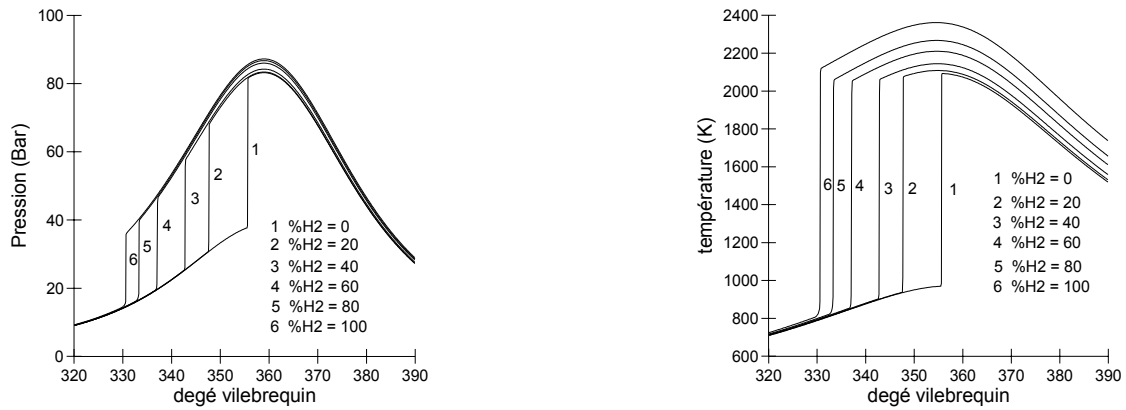


FIG. 1 – Influence de l'addition de l'hydrogène sur l'auto inflammation du mélange

L'analyse de la figure 1 montre que l'addition de l'hydrogène réduit le délai d'inflammation du mélange et fait donc augmenter l'avance à l'allumage. Au fur et à mesure qu'on augmente la proportion d'hydrogène dans le mélange, le moment de l'auto allumage recule et l'avance augmente corrélativement. Pour des taux importants d'hydrogène dans le mélange, la réaction devient détonante et des niveaux de pression et de températures importantes peuvent être atteints pour des richesses très importantes. Pour des mélanges riches, la réduction de la proportion d'hydrogène et de la température initiale en début de compression est nécessaire pour éviter l'apparition du régime détonnant. Au démarrage à froid, on peut donc ajouter des proportions importantes d'hydrogène pour faciliter le démarrage et réduire par la suite sa proportion dans le mélange lorsque les températures de parois deviennent suffisantes pour apporter un effet thermique supplémentaire pour faciliter l'auto inflammation du mélange.

Pour vérifier l'exactitude des résultats obtenus, un cumul du dégagement de chaleur  $Q_d$  est effectué au cours du cycle et comparé à la valeur  $Q_d = (m_c \cdot P_{ci})$ . L'erreur obtenue est moins de 1%.

$\alpha$	0.0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
$m_{CH_4}$ (mg)	10.3	9.7	8.7	7.3	4.9	0.0
$m_{H_2}$ (mg)	0.0	0.3	0.7	1.4	2.5	4.6
$m_{fuel}$ (mg)	10.3	10	9.4	8.7	7.3	4.6
$Q_d$ (Joules)	520.7	523.8	526.5	536.7	542.3	561.4
$Q_d (m \cdot P_{ci})$ °	515	521	519	533	545	552
$Q_p$ %	35.77	39.9	43.2	47.21	49.74	51.45
$W$ (Joules)	220.1	211.2	185.4	154.1	136.2	124.5
$\eta$ %	42.26	37.85	33.85	28.72	25.11	22.17
$\tau_1$ ms	19.52	18.64	18.09	17.45	17.03	16.73
$\tau_2$ ms		18.92	18.35	17.79	17.25	

De plus les délais d'auto inflammation obtenus  $\tau_1$  corrobore exactement avec les valeurs  $\tau_2$  obtenus par la corrélation suivante :

$$\tau_2 = \tau_{CH_4}^{1-\alpha} * \tau_{H_2}^{\alpha} \quad (3)$$

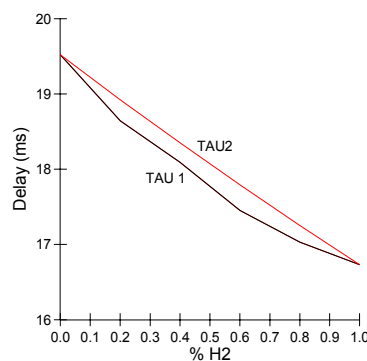


FIG 2. Evolution du délai d'inflammation

Les figures 3 et 4 montrent des disparités importantes entre les résultats obtenus avec les trois mécanismes réactionnels utilisés dans cette étude. Le mécanisme UBC 2.1 génère un faible délai d'inflammation et une grande variation de pression et de température. Le mécanisme gri-mech 1.2 non adapté pour l'addition de l'hydrogène donne un retard à l'auto allumage du mélange. Finalement le mécanisme RAMEC, recommandé dans un grand nombre de publications scientifiques, donne des délais d'inflammation comparables à ceux obtenus expérimentalement

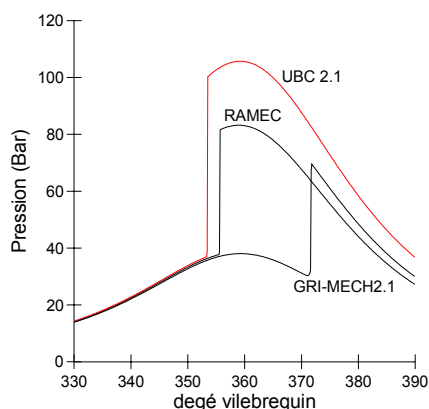


FIG. 3 – Comparaison des trois mécanismes réactionnels- Evolution de la pression

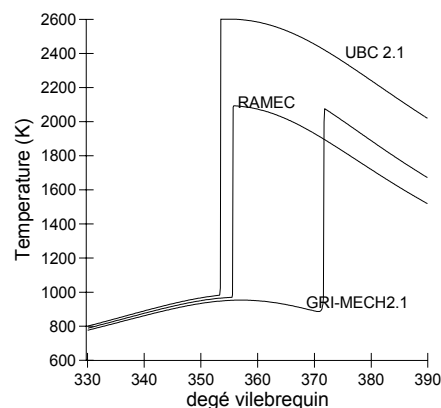


FIG. 4 – Comparaison des trois mécanismes réactionnels- Evolution de la Température

## Conclusion

Le contrôle de la combustion dans les moteurs HCCI demeure un défi à surmonter dans le domaine de la R&D pour une commercialisation effective de ces moteurs. Dans ce travail on a mis en exergue les différents aspects relatifs à l'addition de l'hydrogène dans le mélange méthane/air en vue de contrôler l'auto inflammation de ces mélanges. En effet l'addition de proportion de plus en plus croissante d'hydrogène dans le mélange fait reculer le moment de l'auto inflammation et augmentation de l'avance à l'allumage. L'augmentation de la proportion d'hydrogène dans le mélange suivie d'une avance à l'allumage contraint le moteur à fonctionner en régime détonnant. L'idéal est donc d'ajouter de faibles proportions d'hydrogène pour le contrôle du moment de l'auto inflammation lors du démarrage à froid. A forte charge du moteur, il est recommandé d'utiliser de faibles taux de compression et des températures d'admission modérés pour réduire les effets thermique et chimique responsables de la détonation. De plus l'addition d'hydrogène a un effet non négligeable sur la réduction de la pollution. Les résultats obtenus sont très satisfaisants et comparables à ceux obtenus dans la littérature scientifique. La simulation numérique des problèmes de combustion dans les moteurs à combustion interne demeure une technique efficace et non couteuse pour la compréhension des phénomènes inhérents aux moteurs HCCI.

## References

- [1] S. Tanaka, F. Ayala, J.C. Keck, A reduced chemical kinetic model for HCCI combustion of primary reference fuels in a rapid compression machine. *Combust Flame* 133 (2003) 467
- [2] S. Tanaka, F. Ayala, J.C. Keck, J.B. Heywood, Two-stage ignition in HCCI combustion and HCCI control by fuels and additives, *Combust Flame* 132 (2003) 219–239
- [3] D.R. Mott, E.S. Oran, B. Van Leer, A Quasi-Steady-State Solver for the Stiff Ordinary Differential Equations of Reaction Kinetics, *Journal of Computational Physics* 164, 407–428 (2000)
- [4] B. Boumeddane, Influence des paramètres de fonctionnement sur l'auto inflammation des mélanges de combustible de référence en mode HCCI. 18<sup>ème</sup> Congrès Français de Mécanique. Grenoble, 27-31 août 2007
- [5] Chang, O. Güralp, Z. Filipi, D. Assanis, New Heat Transfer Correlation for an HCCI Engine Derived from Measurements of Instantaneous Surface Heat Flux, *SAE paper* no. 2004-01-2996
- [6] Hua Zhao, HCCI and CAI engines for the automotive industry, Edited by Hua Zhao, woodhead publishing limited cambridge England, ISBN 978-1-84569-128-8 (book)

- [7] Chang, O. Güralp, Z. Filipi, D. Assanis, New Heat Transfer Correlation for an HCCI Engine Derived from Measurements of Instantaneous Surface Heat Flux, SAE paper no. 2004-01-2996
- [8] S.B. Fiveland, D.N. Assanis A Four-Stroke Homogeneous Charge Compression Ignition Engine Simulation for Combustion and Performance Studies. SAE paper no 2000-01-0332
- [9] A. Bhave, M. Kraft, F. Mauss, A. Oakley, H. Zhao, Evaluating the EGR-AFR Operating Range of a HCCI Engine SAE paper no 2005-01-0161
- [10] Halter F., Characterization of the effects of hydrogen addition in premixed methane/air flames. *International Journal of Hydrogen Energy* 32 (2007) 2585 – 2592
- [11] HUANG J., Experimental and Kinetic Study of Shock Initiated Ignition in Homogeneous Methane–Hydrogen–Air Mixtures at Engine Relevant Conditions. *International Journal of Chemical Kinetics*, Volume 38, Issue 4, Pages 221-233, 2006.
- [12] Gersen S., Ignition properties of methane/hydrogen mixtures in a rapid compression machine. *International Journal of Hydrogen Energy*, 33, 1957–1964, 2008.
- [13] Thurnheer T., S.I. engine fuelled with gasoline, methane and methane/hydrogen blends: Heat release and loss analysis. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34, 2494–2503, 2009)
- [14] Chaumeix N., Role of chemical kinetics on the detonation properties of hydrogen /natural gas/air mixtures. *International Journal of Hydrogen Energy* , 32 ,2216 – 2226, 2007
- [15] Petersen E. L., Kinetics Modeling of Shock-Induced Ignition in Low-Dilution CH<sub>4</sub>/O<sub>2</sub> Mixtures at High Pressures and Intermediate Temperatures. *Combustion and Flame*, 117, 272–290, 1999
- [16] Golub V.V., Experimental and numerical investigation of hydrogen gas auto-ignition, *International Journal of Hydrogen Energy*, xxx, 1–8, 2009.
- [17] Gomes Antunes J.M., An investigation of hydrogen-fuelled HCCI engine performance and operation, *International Journal of Hydrogen Energy*, 33, 5823–5828, 2008
- [18] Jinhua Wang, Study of cycle-by-cycle variations of a spark ignition engine fueled with natural gas–hydrogen blends, *International Journal of Hydrogen Energy*, 33, 4876–4883, 2008.